

Estudio numérico de fenómenos de fricción en la nanoescala

Disipación de energía en el fenómeno stick-slip en el marco del modelo Prandtl-Tomlinson

AUTOR

LUIS VALIÑO BORAU

DIRECTOR

DR. JUAN JOSÉ MAZO TORRES



UNIVERSIDAD DE ZARAGOZA

FACULTAD DE CIENCIAS

DEPARTAMENTO DE FÍSICA DE LA MATERIA CONDENSADA

Índice general

1. INTRODUCCIÓN	1
1.1. Modelo de Prandtl-Tomlinson	1
2. OBJETIVOS	4
3. PROGRAMA Y COMPROBACIÓN	5
4. RESULTADOS	7
4.1. Cualitativos	7
4.2. Cuantitativos	15
5. CONCLUSIONES	17

Capítulo 1

INTRODUCCIÓN

El estudio de la fricción ha estado siempre justificado, desde un punto de vista tecnológico, por su importancia en el funcionamiento de cualquier sistema mecánico. Debido a esto, las leyes de la fricción a escala macroscópica están muy claras y se han podido implementar métodos para controlarlas de manera más o menos eficiente a través de los lubricantes. Pero con el paso del tiempo se ha descubierto su influencia crucial en una gran cantidad de procesos de diferentes campos y a diferentes escalas, desde los terremotos [10] hasta los motores moleculares [2] y otros procesos a escala nanométrica. En el caso de los procesos a escalas tan pequeñas, el funcionamiento de la fricción no se comprende realmente y para obtener una descripción teórica satisfactoria parece necesario tener en cuenta todo un conjunto de fenómenos de formación y ruptura de enlaces bajo condiciones rápidamente cambiantes. Dado que hasta hace poco tiempo no existía ningún modo de obtener datos empíricos a escala microscópica, cualquier estudio de la fricción a estas escalas eran meras conjeturas, pero gracias al desarrollo de microscopios tipo AFM (microscopio de fuerza atómica) los datos experimentales sobre *nanofricción* son cada vez más abundantes y el número de estudios teóricos se ha disparado.

Para abordar el problema desde un punto de vista teórico existen varias alternativas. Por un lado es posible simular el movimiento de cada molécula implicada en el proceso, modelando las interacciones entre distintas moléculas mediante potenciales empíricos, este método se conoce como MD (molecular dynamics). El MD, aunque extremadamente preciso, requiere de un enorme poder computacional debido al gran número de moléculas implicadas en el proceso, de forma que no es factible (por ahora) su utilización para superficies de contacto o tiempos no muy pequeños. La alternativa pasa por reducir el número de grados de libertad mediante modelos mesoscópicos, que incluyan los principales parámetros asociados al problema pero que sean lo suficientemente *ligeros* como para poderse utilizar de forma práctica. Dentro de este último grupo destaca el modelo de Prandtl [9]-Tomlinson [12] que es capaz de predecir gran cantidad de fenómenos que se observan experimentalmente y que es el utilizado en este trabajo.

1.1. Modelo de Prandtl-Tomlinson

En su versión más simple este modelo describe el comportamiento de un átomo o molécula al arrastrarlo sobre una superficie sólida, que es básicamente el fenómeno que se produce en los microscopios AFM. La punta del microscopio se modela como una partícula puntual de masa m unida a un muelle de constante efectiva K , el cual se desplaza a velocidad constante v . El muelle se utiliza para reproducir las propiedades elásticas la punta del microscopio. La interacción punta-sustrato se modela mediante un potencial periódico de amplitud U_o y periodicidad a , de forma que el potencial total que sufre la partícula es:

$$U(x) = -U_o \cdot \cos\left(\frac{2\pi x}{a}\right) + \frac{K}{2} (x - vt)^2 \quad (1.1)$$

donde x es la posición de la partícula y t es el tiempo. Las pérdidas de energía debidas a la formación y destrucción de enlaces y a la interacción con fonones se agrupan en un término de fuerza viscosa $-m\gamma\dot{x}$, con γ el coeficiente de *damping*. La temperatura se modela utilizando una fuerza aleatoria tipo Langevin. Sumando todo, la ecuación que describe el comportamiento del sistema es:

$$m \frac{d^2x}{dt^2} + m\gamma \frac{dx}{dt} + \frac{\partial U(x, t)}{\partial x} = \xi(t) \quad (1.2)$$

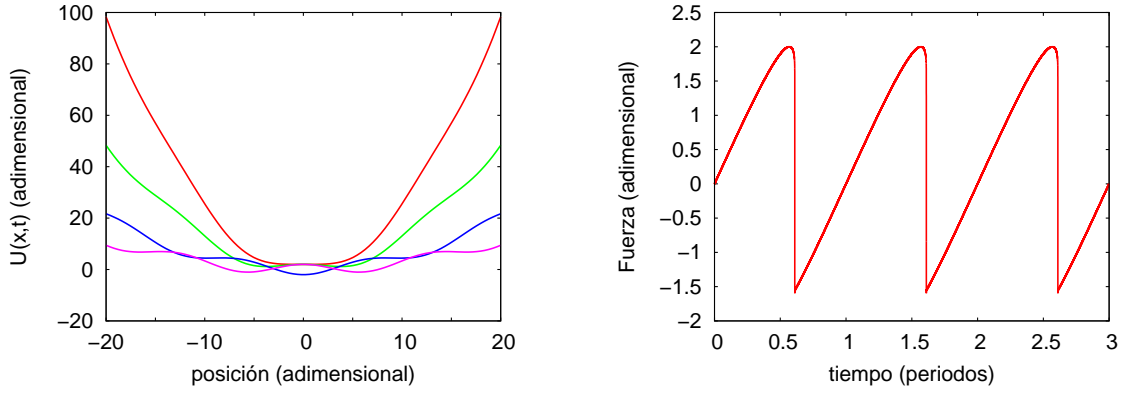


Figura 1.1: En la imagen de la izquierda se observa la forma del potencial total que sufre la partícula para diferentes valores de η . Vemos como el sistema pasa de tener un solo mínimo a tener 4. Los valores de η para los que se producen estas transiciones son 1, 4.6, 7.79, 10.95 [11]. En la otra imagen vemos la relación entre la fuerza (del muelle) y el tiempo para una simulación del modelo de Prandtl-Tomlinson con su característica forma en *dientes de sierra*. Se produce un stick-slip en cada periodo. Los máximos en la fuerza se producen justo antes del salto de la punta al siguiente mínimo.

donde $\xi(t)$ es un ruido aleatorio que cumple $\langle \xi(t) \rangle = 0$ y $\langle \xi(t)\xi(t') \rangle = 2\gamma mk_B T \delta(t - t')$. Una adimensionalización de esta ecuación lleva a:

$$\ddot{z} + \gamma' \dot{z} + \eta \cdot \text{sen}(z) + (z - v'\tau) = \xi'(\tau) \quad (1.3)$$

en este caso z es la posición adimensional y τ el tiempo adimensional. De aquí deducimos que realmente el comportamiento del sistema depende de tan solo 4 parámetros: η , v' , γ' y T' . El primero de ellos es el más importante y da una idea de la proporción entre el potencial del muelle y el del sustrato, viene definido por:

$$\eta = \frac{4\pi^2 \cdot U_o}{K \cdot a^2} \quad (1.4)$$

Los dos siguientes son resultado de la adimensionalización de γ y v :

$$\gamma' = \gamma \cdot \sqrt{\frac{m}{K}} \quad v' = \frac{2\pi v}{a} \cdot \sqrt{\frac{m}{K}} \quad (1.5)$$

Y la adimensionalización de la temperatura es:

$$k_B T' = \frac{4\pi^2 \cdot k_B T}{K \cdot a^2} \quad (1.6)$$

Según el valor de η el potencial tendrá 1, 2, 3 o más mínimos (ver [figura 1.1]), definiendo el movimiento de la punta, que será continuo cuando solo hay un mínimo y de tipo stick-slip en el resto de casos. El stick-slip consiste en el movimiento intermitente de la punta, que queda atrapada en un mínimo de potencial, acumula energía por la elongación del muelle y luego salta al siguiente mínimo cuando esta energía alcanza el valor suficiente como para superar el pozo. Según el sistema esté sobrearmortiguado o subarmortiguado el salto se realizará al mínimo más cercano o a otro, incluso podrían producirse saltos hacia atrás. La forma más típica de reconocer el stick-slip es en la gráfica fuerza de rozamiento (fuerza sobre el muelle) frente al tiempo (o posición del microscopio, no de la punta) [figura 1.1], lo interesante es que se corresponde con lo observado experimentalmente (por ejemplo, [3]).

En cuanto a la velocidad, se puede observar una dependencia logarítmica de esta con la fuerza de rozamiento (fuerza del muelle) para temperaturas distintas de cero [5], en cualquier caso no será tratada en este trabajo. El modelo predice que la fuerza de rozamiento varía en función de la temperatura, llegando a ser muy baja para temperaturas altas en lo que se conoce como régimen de *superlubricidad*. A bajas temperaturas, el efecto de la fuerza aleatoria es el de una reducción efectiva de la altura de las barreras de potencial, ya que permite a la punta saltar antes de lo que lo haría a temperatura cero. En cambio a altas temperaturas la punta tiene tanta energía que puede saltar cualquier barrera sin problemas y se mueve como si no existiese el potencial. Aunque dependiendo de los parámetros, el comportamiento del sistema puede ser más complejo [14]. Más información sobre el modelo en [13].

Aunque el modelo de Prandtl-Tomlinson ha sido estudiado de forma intensiva, todavía quedan algunos aspectos por explorar, entre ellos el de la disipación de energía. ¿Implica necesariamente una mayor fuerza de rozamiento

una mayor disipación de energía?, ¿en qué momento del proceso se produce mayor disipación?, ¿cómo depende la disipación de la temperatura?, ¿hay alguna forma de reducirla de forma efectiva? Estas son algunas de las preguntas que tratarán de contestarse en este trabajo.

Capítulo 2

OBJETIVOS

Los objetivos de este trabajo se pueden dividir en tres partes:

- Construcción de un programa capaz de simular el modelo de Prandtl-Tomlinson con temperatura y oscilaciones y comprobación del correcto funcionamiento del mismo.
- Obtención de gráficas que permitan explicar de modo cualitativo el proceso de disipación de energía, en qué momento tiene lugar y cómo puede modificarse. Para llevar a cabo este punto se realizarán simulaciones para observar si la disipación tiene lugar de forma continua o discontinua y si es de forma discontinua se estudiará la distribución exacta. Se considerarán varias posibilidades para modificar el comportamiento de la disipación; lo primero que se hará es comparar los resultados arrojados por las simulaciones para distintas temperaturas, después se hará lo mismo para distintas amplitudes de oscilación, considerando los dos tipos principales de oscilaciones que existen: *out-of-plane* e *in-plane*.
- Obtención de resultados cuantitativos y comparativa entre fuerza de rozamiento y disipación en distintas condiciones. Este punto consistirá principalmente en la simulación repetida del sistema bajo las mismas condiciones que en el punto anterior, de forma que puedan calcularse resultados medios que incluyan la temperatura, pero excluyan, en la manera de lo posible, cualquier efecto extraordinario asociado a la estocasticidad de la misma. Se obtendrán resultados para la fuerza media, la fuerza máxima y la disipación y se intentará explicar el comportamiento observado. Para ello se utilizarán el concepto de reducción efectiva del parámetro η por oscilaciones y el de *superlubricidad*.

Capítulo 3

PROGRAMA Y COMPROBACIÓN

Sin duda una parte esencial de cualquier trabajo que implique la simulación de un sistema es el programa, en este caso el código puede encontrarse en el ANEXO A. El núcleo del programa es un algoritmo de verlet de orden 2, modificado de tal forma que incluya la temperatura. Antes de incluir en el programa las modificaciones necesarias para calcular la disipación de energía, era necesaria la comprobación de que el núcleo del programa funcionaba correctamente, para ello se compararon los resultados obtenidos para la fuerza de rozamiento media en función del parámetro η a temperatura cero [figura 2], con la predicción teórica (anexo de [6]):

$$\langle F \rangle = \eta - \pi + \frac{4}{3} \sqrt{\frac{\pi}{\eta}} - \frac{1}{2\eta} + \frac{2}{15} \left(\frac{\pi}{\eta} \right)^{3/2} \quad (3.1)$$

Por otro lado se comprobó que las simulaciones reproducían la relación fuerza de rozamiento media frente a temperatura que se ha explicado en la introducción, es decir, la fuerza decrece con la temperatura hasta llegar a un valor muy cercano a cero a temperaturas altas [figura 3.1].

Una vez se sabe que el núcleo del programa funciona correctamente, pasamos a incluir el cálculo de la magnitud central del trabajo, la energía disipada. Para contextualizarlo, conviene obtener la ecuación del balance energético, que obtendremos partiendo de la ecuación en fuerzas. Por tanto partimos de la ecuación:

$$m\ddot{x} + m\gamma\dot{x} + \frac{2\pi}{a} U_o \cdot \text{sen} \left(\frac{2\pi x}{a} \right) + K(x - vt) = \xi(t) \quad (3.2)$$

Para obtener la ecuación en energías, multiplicamos por la velocidad e integramos con respecto al tiempo:

$$\int_{t_1}^{t_2} m\ddot{x}\dot{x} \cdot dt + \int_{t_1}^{t_2} m\gamma\dot{x} \cdot \dot{x} \cdot dt + \int_{t_1}^{t_2} \frac{2\pi}{a} U_o \cdot \text{sen} \left(\frac{2\pi x}{a} \right) \dot{x} \cdot dt + \int_{t_1}^{t_2} K(x - vt) \cdot \dot{x} \cdot dt = \int_{t_1}^{t_2} \xi(t) \cdot \dot{x} \cdot dt \quad (3.3)$$

Donde t_1 y t_2 son dos tiempos cualesquiera durante la evolución del sistema. Hay que tener en cuenta que, dado que estamos moviendo uno de los extremos del muelle con velocidad constante, estamos proporcionando energía al sistema. Por tanto podemos dividir el término del muelle en dos términos distintos, uno asociado únicamente a la energía potencial del muelle y otro únicamente a la energía proporcionada al sistema al mover uno de los extremos del mismo. El primer término se obtiene como:

$$\int_{t_1}^{t_2} \frac{d}{dt} \left(\frac{K}{2} (x - vt)^2 \right) dt = \int_{t_1}^{t_2} K(x - vt) (\dot{x} - v) dt \quad (3.4)$$

Y el segundo es la diferencia entre el término total y este, siendo por tanto:

$$\int_{t_1}^{t_2} K(x - vt) \cdot \dot{x} \cdot dt - \int_{t_1}^{t_2} K(x - vt) (\dot{x} - v) dt = - \int_{t_1}^{t_2} Kv(x - vt) dt \quad (3.5)$$

Así que integrando donde se puede, la ecuación del balance energético queda:

$$\frac{1}{2} m \dot{x}^2 \Big|_{t_1}^{t_2} + \int_{t_1}^{t_2} m\gamma\dot{x}^2 \cdot dt - U_o \cdot \cos \left(\frac{2\pi x}{a} \right) \Big|_{t_1}^{t_2} + \frac{1}{2} K \cdot (x - vt)^2 \Big|_{t_1}^{t_2} = \int_{t_1}^{t_2} \xi(t) \cdot \dot{x} \cdot dt + \int_{t_1}^{t_2} Kv(x - vt) dt \quad (3.6)$$

$$\Rightarrow \Delta E_C + E_D + \Delta E_{P-S} + \Delta E_{P-M} = E_T + E_{I-M} \quad (3.7)$$

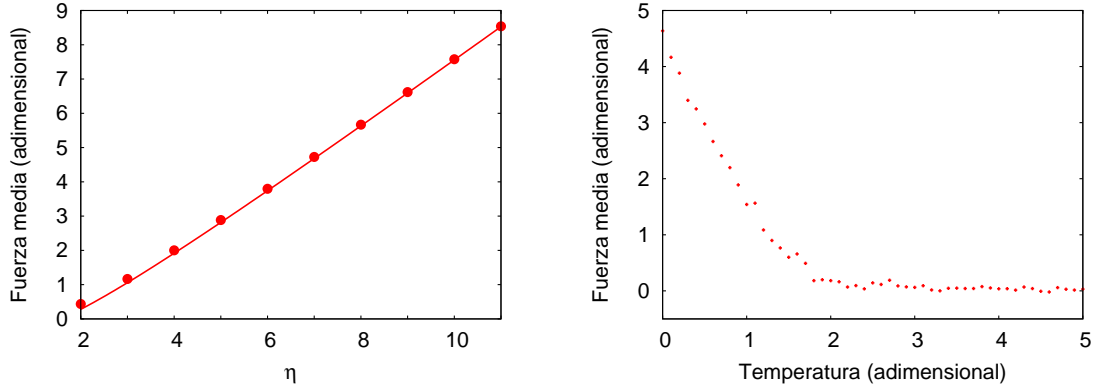


Figura 3.1: En la gráfica de la izquierda se puede ver el ajuste de los datos obtenidos en la simulación respecto a la predicción teórica [eq. 3.1] para $\eta \gg 1$. Efectivamente se ajustan a la perfección para el rango de valores en el que la predicción teórica es válida. Ambos ejes están en unidades adimensionales. En la segunda gráfica se presentan los valores obtenidos para la fuerza media frente a la temperatura, ambos ejes en unidades adimensionales. Se observa la dependencia esperada de acuerdo a, por ejemplo, [13].

Donde E_C es la energía cinética de la punta, E_D es la energía disipada, E_{P-S} es la energía potencial asociada a la interacción punta-sustrato, E_{P-M} es la energía potencial del muelle, E_T la energía térmica que se introduce en el sistema y E_{I-M} es el trabajo realizado para arrastrar el cantilever por la superficie.

Otra parte importante que hay que incluir en el programa son las oscilaciones. Como se muestra en el capítulo 5 de [4], actuar sobre la punta del microscopio mediante oscilaciones, es un método eficaz para reducir la fuerza de rozamiento que esta sufre al desplazarse sobre el sustrato. Y de nuevo el modelo de Prandtl-Tomlinson puede reproducir este fenómeno en sus distintas vertientes. Para ello las modificaciones que hay que hacerle al programa son sencillas, aunque diferentes según consideremos oscilaciones *in-plane* (se hace oscilar la punta sobre el plano del sustrato) o *out-of-plane* (se hace oscilar la punta en dirección perpendicular al plano del sustrato). En el primer caso se modifica el término de la fuerza del muelle (lo equivalente a mover el microscopio hacia delante y hacia atrás), en el segundo caso se modifica el término del potencial (lo equivalente a mover el sustrato hacia arriba y hacia abajo):

$$K(x - vt) \longrightarrow K(x - vt - a \cdot \beta \sin(2\pi ft)) \quad (3.8)$$

$$U_o \cdot \sin\left(\frac{2\pi x}{a}\right) \longrightarrow U_o \cdot \sin\left(\frac{2\pi x}{a}\right) (1 + \alpha \sin(2\pi ft)) \quad (3.9)$$

Siendo f la frecuencia de oscilación y α y β las amplitudes de oscilación.

Capítulo 4

RESULTADOS

4.1. Cualitativos

En este apartado se recoge todo el conjunto de gráficas que pueden explicar el fenómeno de la disipación en el modelo de Prandtl-Tomlinson de forma cualitativa. Lo primero que intenta mostrarse es en qué momento ocurre la mayor parte de la disipación y por qué. Después se muestra la forma concreta de la curva de disipación y su dependencia con la temperatura. Por último se ilustra el efecto de las oscilaciones en la disipación. Todas las gráficas están en unidades adimensionalizadas de acuerdo a lo expuesto en los apartados anteriores, para hacerse a la idea de la magnitud de las temperaturas que se tienen en cuenta en este trabajo, tomamos el set de parámetros típico en experimentos y desarrollos teóricos ([14], [7]) $a = 0,246 \text{ nm}$, $K = 3,73 \text{ N/m}$ y obtenemos que una temperatura de $T = 300 \text{ K}$ equivale a un valor de la temperatura adimensional $KT' = 0,72$.

Puesto que parece lógico que la temperatura tenga algún efecto en la disipación, para estudiar cuándo se produce la disipación, empezaremos estudiando lo que ocurre a $T = 0$. Sabemos que la energía disipada depende de la velocidad de forma cuadrática, así que cuanto mayor sea la velocidad mayor será la disipación. Como se muestra [figura 4.1], la velocidad de la punta es prácticamente cero durante todo el proceso, salvo durante unos breves instantes, que se corresponden con los saltos de la punta de un mínimo al siguiente. Es decir, el modelo predice que en el régimen de stick-slip, casi la totalidad de la disipación se produce durante el slip.

¿Cuál es la situación a temperatura distinta de cero? En varios artículos, por ejemplo, [13] o [8], se demuestra que de acuerdo al modelo, la fuerza de fricción depende de la temperatura. Pero el comportamiento de la disipación es muy diferente y esto tiene importancia, por ejemplo, en el desgaste que sufrirá la punta. Podemos verlo en [figura 4.2], donde observamos como la disipación de energía es mayor en el slip cuanto mayor es la temperatura, esto se debe a que la temperatura aumenta el valor medio del cuadrado de la velocidad. La conclusión es que a mayor temperatura, aunque la fuerza de rozamiento media es menor, se produce mayor disipación de energía, ya que se tiene que disipar la energía aportada por el baño térmico. En cuanto a dónde se produce esta disipación, podemos ver que conforme aumenta la temperatura, la disipación deja de estar tan concentrada en el slip, ya que el efecto de la temperatura es el de aumentar el módulo de la velocidad y por tanto producir disipación, durante todo el proceso. Para temperaturas altas la disipación durante periodos de stick es tan alta que su magnitud es equivalente a la disipación en el slip a temperatura cero.

En [figura 4.3] vemos lo que ocurre para un valor distinto de la constante adimensional η . Como podemos observar, conforme aumenta la temperatura lo hace también la disipación, pero en este caso la progresión es diferente. Para $\eta_{PT} = 2$, la energía necesaria para realizar un slip es mucho menor, de forma que los slips se producen con velocidades menores y llevan por tanto asociada una menor disipación. Tanto es así que la disipación durante los periodos de stick, que se debe únicamente al ruido térmico, rivalizan en magnitud con la disipación en los slips.

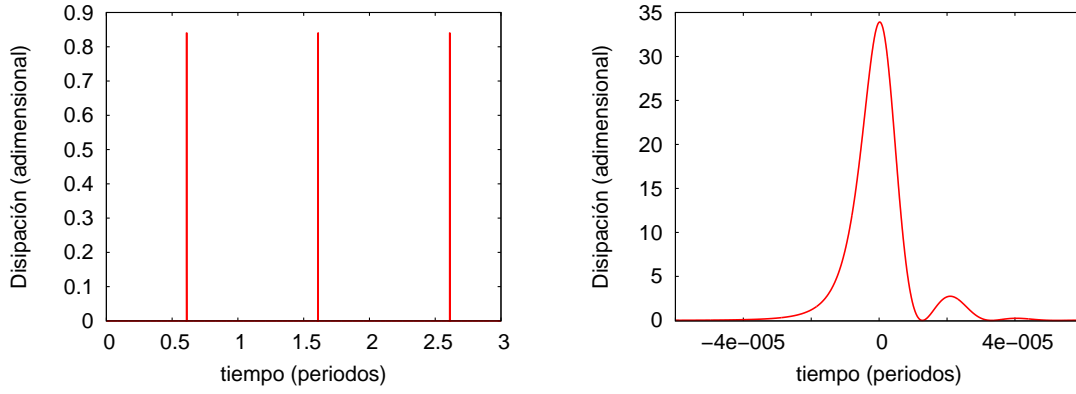


Figura 4.1: En la imagen de la izquierda vemos el comportamiento de la disipación durante tres periodos enteros de stick-slip. El tiempo τ está en unidades de periodos de stick-slip: $\tau = v' \cdot t' / 2\pi$, donde v' es la velocidad adimensional del microscopio y t' el tiempo adimensional. La disipación está en unidades adimensionales de potencia. La segunda imagen se corresponde con uno de los tres picos de disipación de la primera, se ha centrado el pico entorno al cero.

En [figura 4.4] vemos una comparación entre ambos valores de η . En ella vemos que la disipación es órdenes de magnitud mayor para $\eta_{PT} = 7$, lo cual está de acuerdo con la definición de $\eta_{PT} = 4\pi^2 \cdot U_0 / (k \cdot a^2)$, con U_0 la altura del potencial, k la constante elástica del muelle y a el espaciado interatómico. Por tanto un valor de η_{PT} mayor viene dado por una altura del potencial mayor, una constante elástica menor y/o un espaciado interatómico menor. Todo lo anterior implica un potencial más alto y más abrupto, lo que contribuye a una mayor fuerza de stick (fuerza sobre el muelle durante el stick) y por tanto una mayor liberación y disipación de energía en el slip, que es lo que observamos. También es la razón por la cual la temperatura crítica a la que se alcanza el régimen de *termolubricidad* (*superlubricidad* por temperatura) es menor para $\eta = 2$ que para $\eta = 7$, ya que cuanto menos energía sea necesaria para saltar, antes la igualará la energía aportada por la temperatura.

En resumen, de estas gráficas deducimos que como era de esperar, la temperatura aumenta la disipación de energía de la punta. Además conforme aumenta la temperatura, el slip deja de ser el momento en el que se produce casi la totalidad de la disipación, ya que también se produce disipación durante el stick.

En las siguientes gráficas, desde [figura 4.5] hasta [figura 4.9] se muestra cómo se altera la disipación en el sistema cuando añadimos oscilaciones del potencial, es decir, *out-of-plane*. La amplitud de oscilación α es adimensional, de forma que un valor de $\alpha = 1$ equivale a doblar el potencial en algunos momentos y a anularlo en otros. La frecuencia adimensional a la que se hace oscilar el sistema es aquella para la cual el efecto de las oscilaciones es máximo, de acuerdo a lo observado en [figura 4.4].

El efecto de las oscilaciones *out-of-plane* es sencillo, al ser un potencial oscilante, habrá momentos en los que la barrera de potencial sea mayor que la correspondiente al valor de η y habrá otros en los que sea menor. Lo que ocurrirá es que durante el stick se irá acumulando energía en el muelle y en el momento en el que el potencial tenga un valor menor que esa energía, la punta saltará. Puesto que las oscilaciones reducen la altura del potencial por debajo de su valor normal, facilitan que el salto ocurra antes y con una fuerza menor [6]. Es muy importante el papel de la frecuencia en este proceso, si la frecuencia es demasiado lenta el efecto de la oscilación del potencial será despreciable, ya que apenas variará durante un periodo de stick-slip. Por otro lado si es demasiado rápida, la punta no podrá avanzar favorecida por un potencial momentáneamente bajo, ya que al instante siguiente volverá a ser demasiado alto como para superarlo.

Fijándonos en la gráfica a temperatura cero [figura 4.5] observamos que conforme aumenta la amplitud de oscilación, la disipación es menor. Esto está completamente de acuerdo con lo esperado, las oscilaciones del potencial facilitan que se produzca el slip para valores mucho más pequeños de la fuerza y por tanto se libera menos energía durante el slip. Por tanto, a diferencia de la temperatura, las oscilaciones reducen la fuerza de rozamiento reduciendo también la disipación. Conforme aumenta la temperatura se sigue manteniendo el mismo efecto, al menos para amplitudes de oscilación bajas.

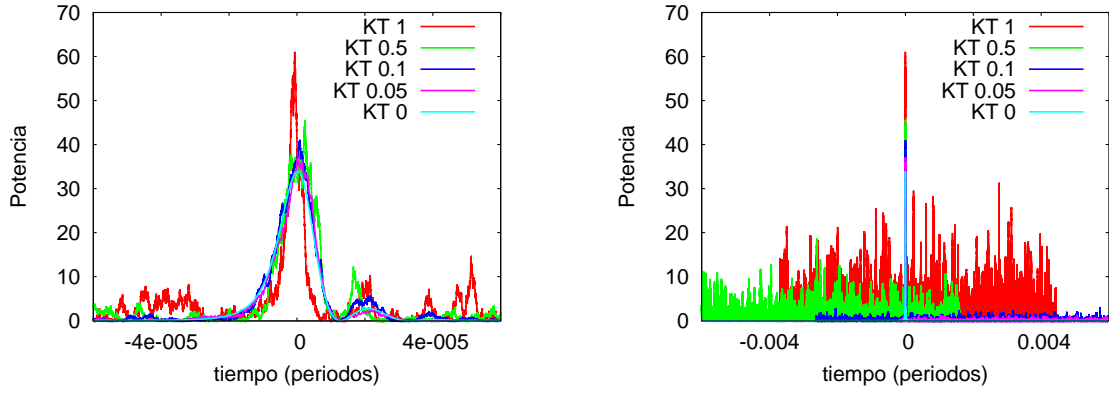


Figure 4.2: En la gráfica de la izquierda se presenta la dependencia del calor disipado por unidad de tiempo frente al tiempo para diferentes temperaturas. El tiempo τ está en unidades de periodos de stick-slip: $\tau = v' \cdot t' / 2\pi$, donde v' es la velocidad adimensional y t' el tiempo adimensional. Se han centrado todos los picos de disipación del slip en el cero. El calor disipado por unidad de tiempo es $Q = \gamma' \cdot v' \cdot v'$ con γ' el parámetro de 'damping' adimensional. Los valores de los parámetros adimensionales utilizados son: $\gamma' = 2$, $\eta_{PT} = 7$, $v' = 10^{-4}$ y temperaturas adimensionales $KT' = 0, 0.05, 0.1, 0.5, 1$. Un valor adimensional de la temperatura de 0.72 equivale a una temperatura de 300 K. A temperaturas del orden de 2 se está de lleno en el régimen de superlubricidad.

La gráfica de la derecha es igual que la otra, solo que se incrementa el rango presentado en el eje X.

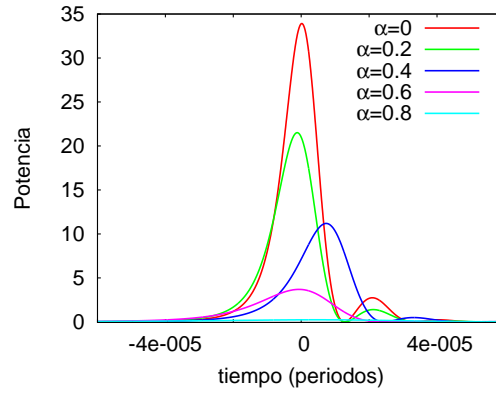


Figure 4.5: En la gráfica de la izquierda se presenta la dependencia del calor disipado por unidad de tiempo frente al tiempo para diferentes valores de la amplitud de oscilación del potencial (α). De nuevo el tiempo está expresado en periodos adimensionales y el calor disipado por unidad de tiempo en unidades adimensionales de potencia. Los parámetros adimensionales utilizados son $\gamma' = 2$, $\eta_{PT} = 7$, $v' = 10^{-4}$ y $KT' = 0$.

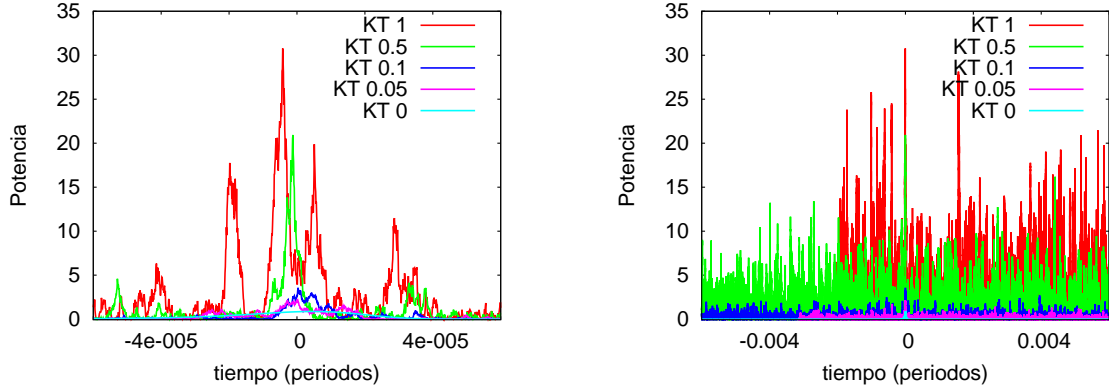


Figure 4.3: En la gráfica de la derecha se presenta la dependencia del calor disipado por unidad de tiempo frente al tiempo para diferentes temperaturas. El tiempo τ está en unidades de periodos de stick-slip: $\tau = v' \cdot t' / 2\pi$, donde v' es la velocidad adimensional y t' el tiempo adimensional. Se han centrado todos los picos de disipación del slip en el cero. El calor disipado por unidad de tiempo es $Q = \gamma' \cdot v' \cdot v'$ con γ' el parámetro de 'damping' adimensional. Los valores de los parámetros adimensionales utilizados son: $\gamma' = 2$, $\eta_{PT} = 2$, $v' = 10^{-4}$ y temperaturas adimensionales $KT' = 0, 0.05, 0.1, 0.5, 1$. De acuerdo a la figura 2, un valor adimensional de la temperatura de 0.72 equivale a una temperatura de 300 K. A temperaturas del orden de 1 se está de lleno en el régimen de superlubricidad.

A la derecha se presenta la misma imagen que la anterior con un mayor rango en el eje X.

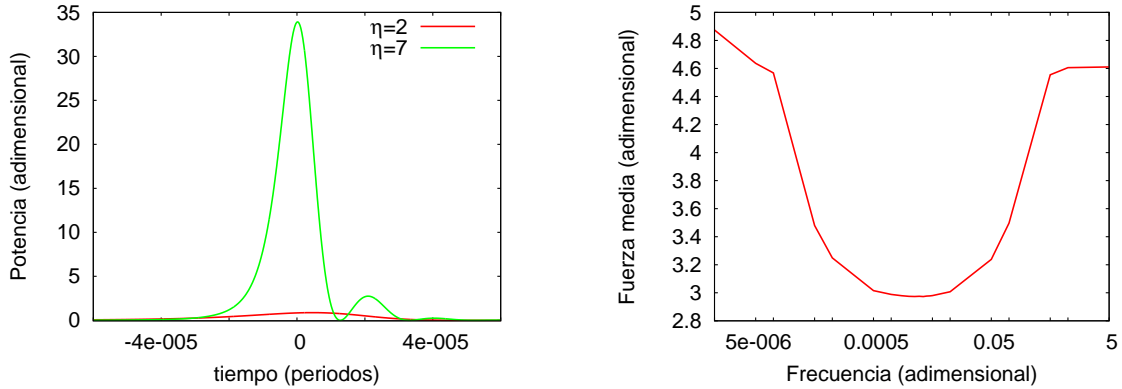


Figure 4.4: En la gráfica de la izquierda se compara la disipación en el slip a temperatura cero para dos valores distintos del parámetro η_{PT} : 2 y 7.

En la otra figura vemos la dependencia de la fuerza de rozamiento media frente a la frecuencia de oscilación (ambas magnitudes adimensionales) para $\eta = 7$ y $\alpha = 0.3$. El mínimo se encuentra en $f = 0.0035$, que es el valor que se utilizará en el resto de simulaciones.

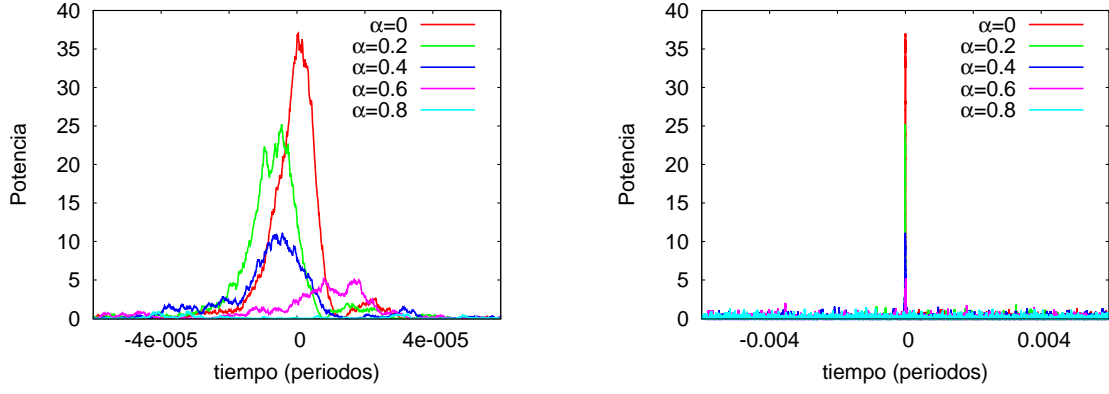


Figure 4.6: En la gráfica de la izquierda se presenta la dependencia del calor disipado por unidad de tiempo frente al tiempo para diferentes valores de la amplitud de oscilación del potencial (α). De nuevo el tiempo está expresado en periodos adimensionales y el calor disipado por unidad de tiempo en unidades adimensionales de potencia. Los parámetros adimensionales utilizados son $\gamma' = 2$, $\eta_{PT} = 7$, $v' = 10^{-4}$ y $KT' = 0.05$. Los resultados obtenidos son similares a los de [figura 4.5], la amplitud de oscilación reduce la disipación de energía.

La otra gráfica se corresponde con la anterior con un mayor rango en el eje X. Se observa que la disipación fuera del slip no depende de α .

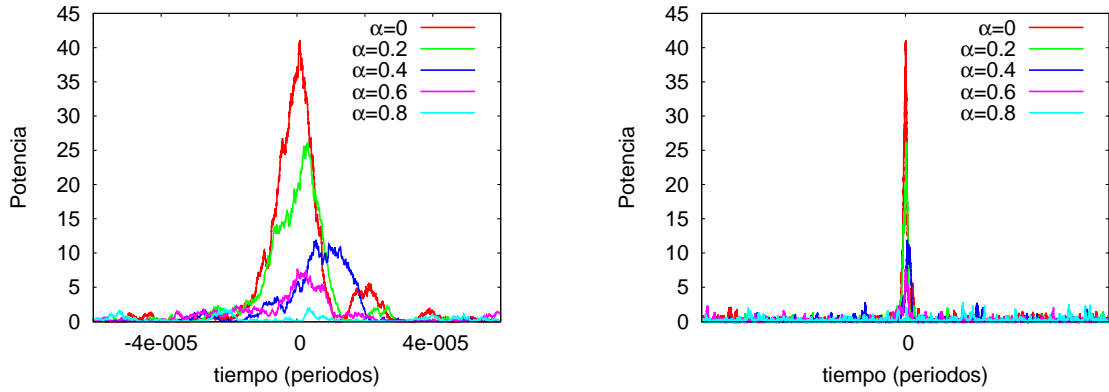


Figure 4.7: En la gráfica se presenta la dependencia del calor disipado por unidad de tiempo frente al tiempo para diferentes valores de la amplitud de oscilación del potencial (α). De nuevo el tiempo está expresado en periodos adimensionales y el calor disipado por unidad de tiempo en unidades adimensionales de potencia. Los parámetros adimensionales utilizados son $\gamma' = 2$, $\eta_{PT} = 7$, $v' = 10^{-4}$ y $KT' = 0.1$. La otra gráfica se corresponde con la anterior con un mayor rango en el eje X. En ambas se observa algo similar a lo de temperaturas menores.

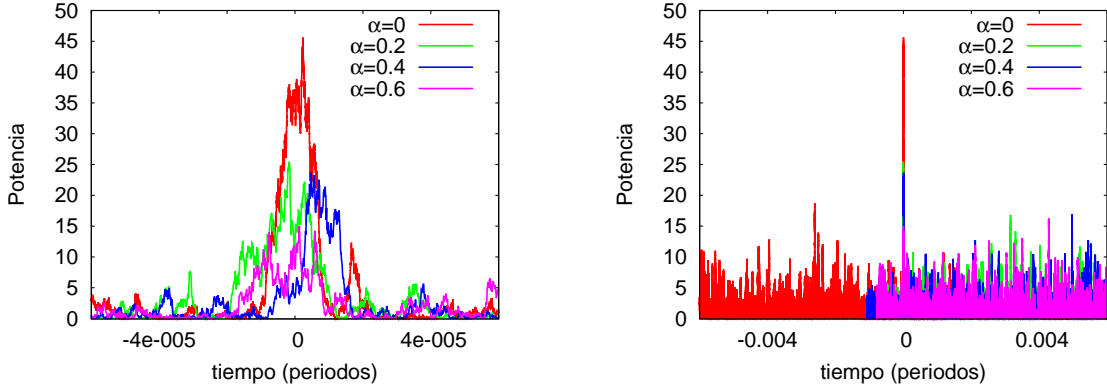


Figure 4.8: En la gráfica se presenta la dependencia del calor disipado por unidad de tiempo frente al tiempo para diferentes valores de la amplitud de oscilación del potencial (α). De nuevo el tiempo está expresado en periodos adimensionales y el calor disipado por unidad de tiempo en unidades adimensionales de potencia. Los parámetros adimensionales utilizados son $\gamma' = 2$, $\eta_{PT} = 7$, $v' = 10^{-4}$ y $KT' = 0.5$.

En la otra gráfica se presenta lo mismo que en la anterior con un mayor rango en el eje X. Se puede observar que para $\alpha = 0.6$ el pico de disipación en el slip es de la misma altura que un pico que no se corresponde con un slip.

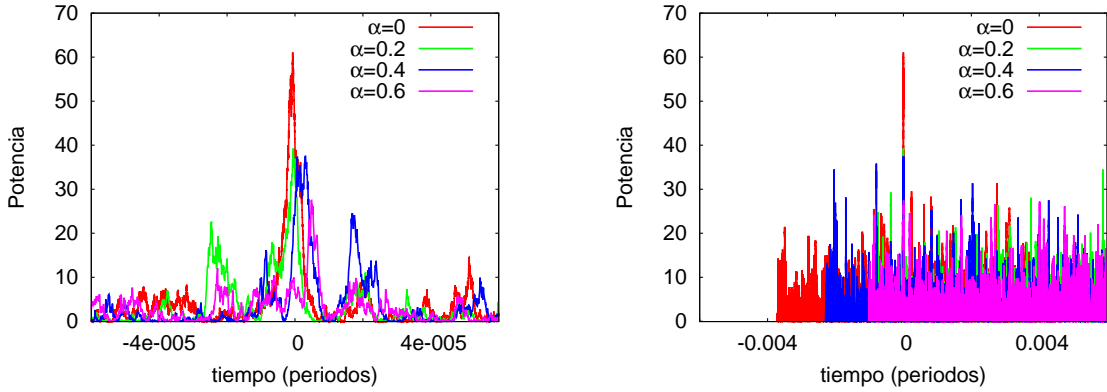


Figure 4.9: En la gráfica se presenta la dependencia del calor disipado por unidad de tiempo frente al tiempo para diferentes valores de la amplitud de oscilación del potencial (α). De nuevo el tiempo está expresado en periodos adimensionales y el calor disipado por unidad de tiempo en unidades adimensionales de potencia. Los parámetros adimensionales utilizados son $\gamma' = 2$, $\eta_{PT} = 7$, $v' = 10^{-4}$ y $KT' = 1$. Podemos considerar la amplitud de oscilación como una reducción efectiva del parámetro η_{PT} ([1]) que ya sabemos que depende de la altura del potencial. Vemos por tanto el mismo fenómeno que hemos observado en la comparación entre $\eta_{PT} = 7$ y $\eta_{PT} = 2$, cuanto mayor es el valor de η_{PT} , mayor es el pico en la disipación, pero a altas temperaturas el efecto queda enmascarado por la disipación de la energía térmica.

La otra gráfica se corresponde con la anterior con un mayor rango en el eje X. Para los valores altos de α los picos de disipación de mayor altura no se dan en el slip. Aunque se disponía de más datos sólo se han presentado aquellos en los que el slip estaba claramente diferenciado, de hecho para valores de α mayores, el pico del slip es completamente indistinguible del fondo térmico.

El efecto que observamos para valores altos de α en [figura 4.8] y [figura 4.9] puede entenderse si consideramos que las oscilaciones reducen el valor efectivo de η , de forma que de acuerdo a [1],

$$\eta_{eff} \simeq \eta(1 - \alpha) \quad (4.1)$$

y por tanto para valores de $\alpha = 0.6$, obtenemos $\eta_{eff} \simeq 2.8$ y para valores de $\alpha = 1$ obtenemos $\eta_{eff} = 0$. Antes se ha comentado que para temperaturas del orden de 1 y $\eta = 2$, el sistema se encuentra de lleno en el régimen de *superlubricidad*, de forma que la progresiva desaparición de los picos de disipación en el slip para valores altos de α , se puede entender considerando que el sistema entra paulatinamente en régimen de *superlubricidad*, en el cual hay numerosos picos de disipación, asociados o no a slips, ya que la punta se mueve con total libertad (los pozos de potencial no son nada en comparación con la energía térmica).

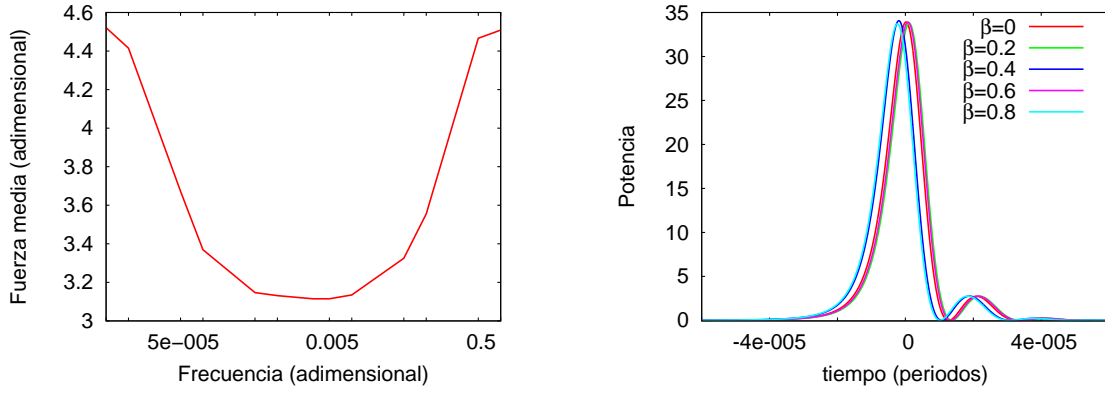


Figura 4.10: En la figura de la izquierda vemos la dependencia de la fuerza de rozamiento media frente a la frecuencia de oscilación (ambas magnitudes adimensionales) para $\eta = 7$ y $\beta = 0,3$. El mínimo se encuentra aproximadamente en $f = 0,0035$, que es el valor que se utilizará en el resto de simulaciones.

En la figura de la derecha se puede observar la dependencia del calor disipado por unidad de tiempo frente al tiempo para diferentes valores de la amplitud de oscilación del potencial (β). De nuevo el tiempo está expresado en periodos adimensionales y el calor disipado por unidad de tiempo en unidades adimensionales de potencia. Los parámetros adimensionales utilizados son $\gamma' = 2$, $\eta_{PT} = 7$, $v' = 10^{-4}$ y $KT' = 0$. La disipación es igual en todos los casos.

Por otro lado tenemos las oscilaciones *in-plane*, es decir, oscilaciones del extremo del muelle en el que no está la punta, que en un microscopio AFM se correspondería con el cantilever. El efecto que tienen estas oscilaciones es parecido al que tienen las oscilaciones *out-of-plane* pero por razones completamente distintas. Imaginemos la punta del microscopio en un mínimo de potencial, las oscilaciones harán variar la elongación del muelle, reduciendo y luego aumentando la fuerza sobre la punta. Cuando debido a las oscilaciones la fuerza alcance el valor suficiente para saltar, la punta pasará al siguiente mínimo, pero la elongación media del muelle será menor que si no hubiese oscilaciones, ya que el salto se ha producido en un máximo de elongación. De esta forma la fuerza media sobre la punta se reduce ([6]), pero veremos en las gráficas [figura 4.11] y [figura 4.10] como las oscilaciones no tienen efecto sobre la disipación, ya que la punta requiere la misma fuerza y por tanto la misma energía para saltar que sin oscilaciones.

En este caso para hacernos una idea de la magnitud de la amplitud de oscilación β , nos fijamos en que va multiplicada por a en la ecuación, de forma que un valor de $\beta = 1$ conlleva una oscilación de un periodo interatómico de amplitud. De nuevo buscamos la frecuencia para la cual los efectos de las oscilaciones son más evidentes, de acuerdo a lo observado en [figura 4.10].

Las oscilaciones *in-plane* también pueden considerarse de acuerdo a [6] como una reducción efectiva del parámetro η :

$$\eta_{eff} = \eta - 2\pi\beta \quad (4.2)$$

Lo que vemos en estas gráficas es que esto no es cierto para la disipación, ya que esta es exactamente igual para valores altos de β que para valores bajos.

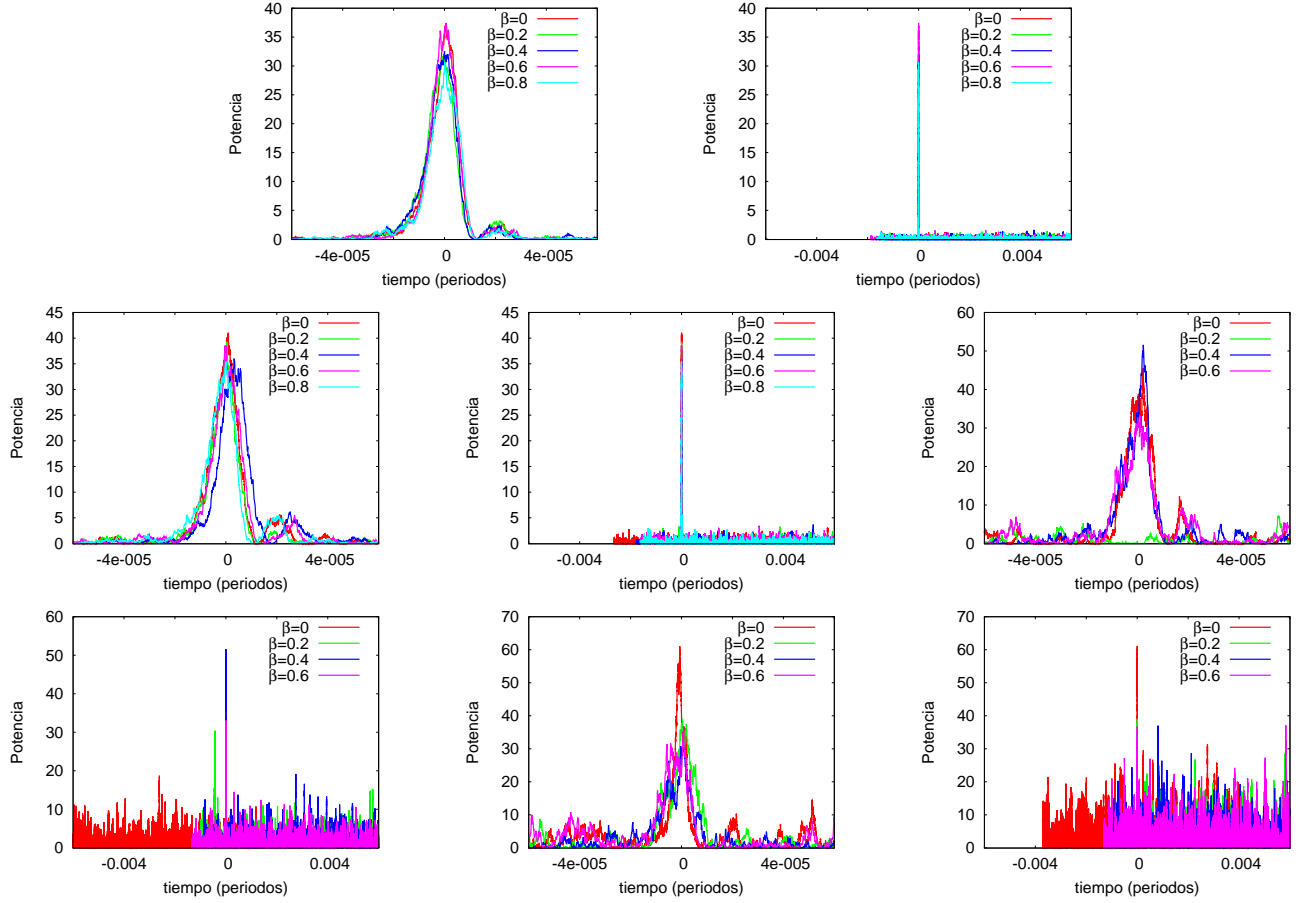


Figura 4.11: En estas gráficas se presenta el calor disipado por unidad de tiempo frente al tiempo para diferentes valores de la amplitud de oscilación del potencial (β). De nuevo el tiempo está expresado en periodos adimensionales y el calor disipado por unidad de tiempo en unidades adimensionales de potencia. Los parámetros adimensionales utilizados son $\gamma' = 2$, $\eta_{PT} = 7$, $v' = 10^{-4}$ y $KT' = 0.05, 0.1, 0.5$ y 1 . Como esperábamos en ningún caso (excepto a $KT = 1$) la disipación depende de la amplitud de oscilación, ni en la disipación en los picos, ni en el fondo térmico. La diferencia de altura en los picos que se observa a temperatura $KT = 1$ se comenta en el siguiente apartado.

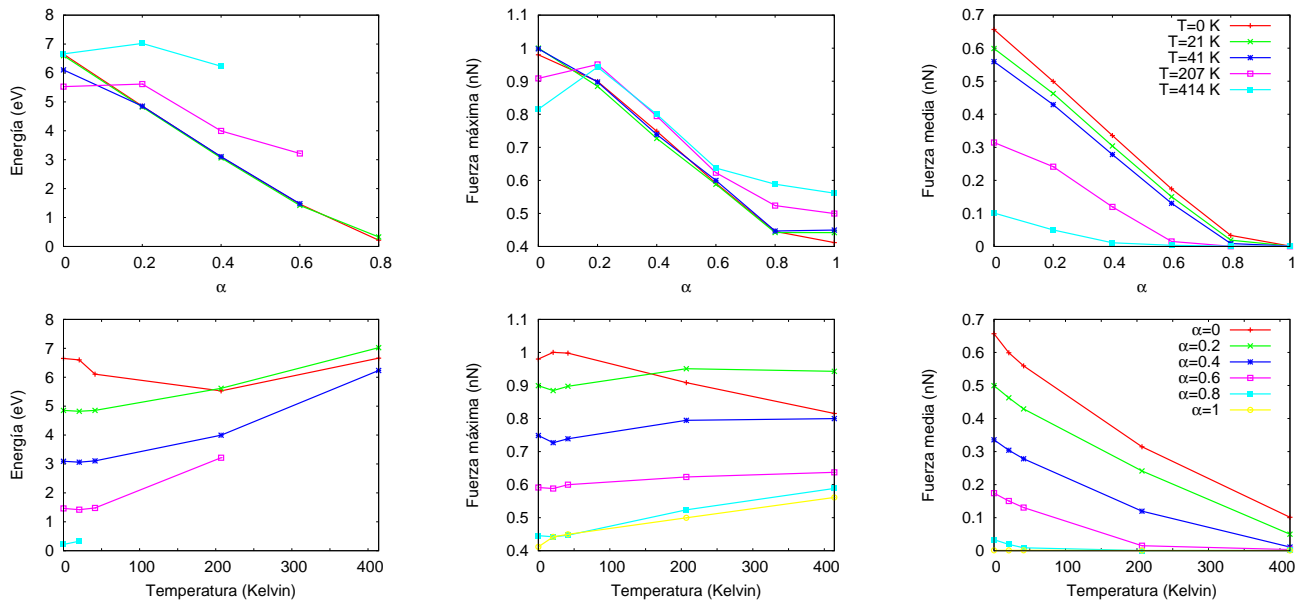


Figura 4.12: Gráficas con oscilaciones *out-of-plane*. En la primera fila se presentan las dependencias de la energía disipada, fuerza máxima y fuerza media en función de la amplitud de oscilación. En la segunda fila se presentan las dependencias en función de la temperatura, los datos son los mismos representados de dos formas distintas. Cada fila comparte la misma leyenda. Hay puntos para los que hay datos para la fuerza y no para la energía disipada en el slip, esto es así porque bajo oscilaciones *out-of-plane* de suficiente amplitud, el sistema es capaz de saltar hacia delante y hacia atrás debido al efecto de la temperatura sobre un potencial efectivo de baja altura y por lo tanto para estos valores no existe un solo pico de disipación, esto es fácil de ver para valores de $\alpha = 1$, que conllevan un potencial efectivo llano. Los valores de T y α para los que se simula se corresponden con los utilizados en el apartado de resultados cualitativos.

4.2. Cuantitativos

Una vez conocemos cómo se comporta el sistema de forma cualitativa, parece necesario ir un paso más allá y obtener resultados cuantitativos para el valor de la disipación. En este apartado se presentarán los datos obtenidos a partir de las simulaciones, para fuerza media y máxima así como para energía disipada en el slip. Se han realizado todas las simulaciones con los parámetros adimensionales $\gamma' = 2$, $\eta_{PT} = 7$ y $v' = 10^{-4}$, que pueden asociarse al set de parámetros típico en experimentos y desarrollos teóricos ([14], [7], [6]) $a = 0,246\text{ nm}$, $K = 3,73\text{ N/m}$, $U_o = 0,25\text{ eV}$ y $m = 2 \cdot 10^{-12}\text{ Kg}$, para la velocidad se usa un valor $v = 5,4\text{ nm/s}$. En el apartado anterior se han mostrado las gráficas de las cuales se han obtenido los valores adimensionales para las frecuencias a las cuales se han realizado las simulaciones, los valores obtenidos han sido muy cercanos a $f = 0,0035$ para ambos tipos de oscilaciones, esta frecuencia adimensional se corresponde con una frecuencia $\nu = 4,8\text{ KHz}$.

En este caso la variable que utilizaremos para cuantificar la disipación no será la potencia disipada, sino la energía disipada en el slip. Para ello necesitamos saber cuánto tiempo dura el slip, lo cual es muy sencillo ya que al menos para los valores de los parámetros utilizados siempre dura prácticamente lo mismo, $1 \cdot 10^{-4}$ periodos de stick-slip (lo que da una idea de lo poco que dura en comparación con el stick) o $4,6 \cdot 10^{-6}\text{ s}$. Este valor se obtiene independientemente de si se aplican o no oscilaciones así como de la temperatura. Puesto que queremos comparar los resultados a distintas temperaturas, debemos restar el fondo térmico de disipación no asociada al slip, que se obtiene simplemente como $KT' \cdot \gamma' \cdot t'$ que es el producto del tiempo que dura el slip por la potencia térmica suministrada a la partícula por la temperatura. En cualquier caso, debido a que este cálculo está pensado para sistemas en equilibrio y durante el slip el sistema no lo está, la gráfica que muestra la dependencia de la energía disipada con la temperatura no pretende ser del todo exacta.

Las gráficas que muestran la dependencia de la fuerza de rozamiento media [figura 4.12] presentan una forma similar a la que podemos ver en [6], es decir, se aprecia una reducción del rozamiento con la temperatura y la amplitud de oscilación; en cambio la fuerza máxima decrece con la amplitud de oscilación y apenas varía con la temperatura. Esto tiene sentido considerando que el aumento de α permite que la punta salte antes, de forma que la fuerza sobre el muelle ha de ser por fuerza menor y por tanto fuerza máxima y fuerza media disminuyen con α . Sin embargo, aunque la temperatura también hace que la punta salte antes, puesto que puede empujarla

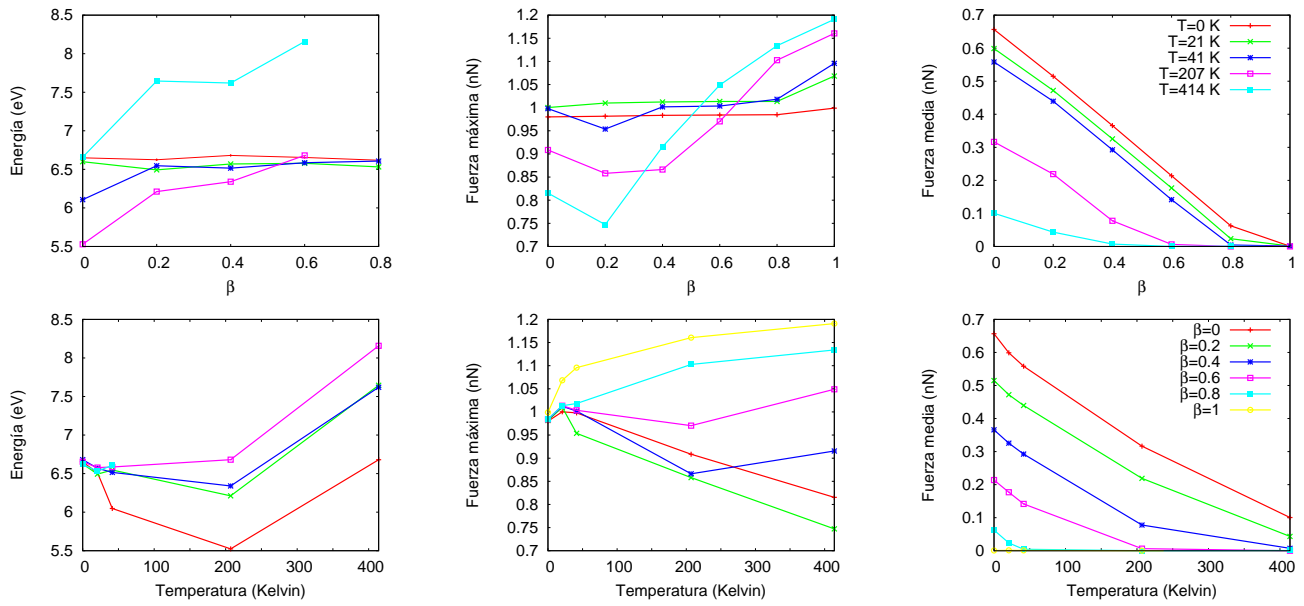


Figura 4.13: Gráficas con oscilaciones *in-plane*. En la primera fila se presentan las dependencias de la energía disipada, fuerza máxima y fuerza media en función de la amplitud de oscilación. En la segunda fila se presentan las dependencias en función de la temperatura, los datos son los mismos representados de dos formas distintas. Cada fila comparte la misma leyenda. Igual que sucedía con las oscilaciones *out-of-plane*, hay puntos para los que no se presentan los datos para la energía disipada en el slip debido a que no hay un solo pico de disipación diferenciable.

en dirección contraria con la misma probabilidad, al final la fuerza máxima permanece más o menos constante; pero como el valor máximo de la fuerza se da durante menos tiempo, la fuerza media disminuye. El aumento en la fuerza máxima para valores altos de la temperatura y de la amplitud de oscilación, se puede explicar por la transición progresiva que sufre el sistema hacia un régimen de *termolubricidad* (*superlubricidad* por temperatura). Cuando el sistema se encuentra en este régimen, un aumento en T o α , provocará que la punta se mueva con mayor libertad, de forma que los efectos térmicos pueden llevarla más lejos y por tanto modificar más la longitud del muelle y con ella la fuerza máxima.

Pero la magnitud principal bajo estudio es la disipación en el slip, que como podemos ver crece con la temperatura y decrece con la amplitud de oscilación, a pesar de que le hemos restado la energía aportada por el fondo térmico. Las razones detrás de la dependencia con la temperatura no están claras, lo que sabemos es que no puede deberse a la fuerza máxima ya que esta permanece más o menos constante; quizás se deba a la fórmula utilizada para el cálculo del fondo térmico. Por otro lado el efecto de la amplitud de oscilación es evidente, ya que permite saltar a la punta con menos energía. Parece necesario notar como para la curva de disipación con $\alpha = 0$, se produce una disminución de la disipación para las temperaturas de 41 K y 207 K frente a la observada a temperatura cero o a temperaturas más altas.

En cuanto a los efectos de las oscilaciones *in-plane*, vemos como la fuerza media decrece tanto con la temperatura como con la amplitud de oscilación, de acuerdo a lo esperado [6]. La dependencia de la fuerza máxima con la temperatura es parecida a la vista para oscilaciones *out-of-plane*, lo que se explica por los mismos motivos. Pero la dependencia con la amplitud de oscilación β es muy diferente; la fuerza máxima es la misma independientemente de β , excepto para valores altos de T , para los cuales aumenta. El hecho de que la fuerza máxima permanezca constante se ajusta perfectamente a lo esperado, ya que este tipo de oscilaciones no reducen las barreras de potencial que debe superar la punta.

El comportamiento de la energía disipada en el slip es en este caso bastante interesante. Por un lado comprobamos que en general aumenta con la temperatura igual que ocurre para oscilaciones *out-of-plane*. Además vemos como para temperaturas bajas la disipación no depende en absoluto de la amplitud de oscilación, tal y como preveíamos; esto está en perfecta consonancia con lo observado en la fuerza máxima; como esta permanece constante, la energía que necesita la punta para saltar es la misma. Pero vemos como para temperaturas de 414 K y 207 K, tanto la disipación como la fuerza máxima aumentan con la amplitud de oscilación, sin embargo en las simulaciones se observa como el sistema sigue teniendo un slip definido, de forma que no puede asociarse a ningún efecto de *superlubricidad*.

Capítulo 5

CONCLUSIONES

En el proceso de stick-slip, la disipación de energía sufre un pico en el momento del slip, lo que puede conllevar un brusco aumento de la temperatura local en el sistema y provocar procesos de abrasión, deformación, desgaste e incluso facilitar la interacción química entre superficies; de ahí la importancia de entender y controlar los procesos de fricción a escala atómica, marco conceptual en el que se sitúa el trabajo realizado. Aunque interesante, la falta de resultados experimentales con los que comparar los datos obtenidos no permite sacar conclusiones definitivas sobre este tema. En cualquier caso se ha comprobado como de acuerdo al modelo de Prandtl-Tomlinson, el efecto de la temperatura es siempre el de aumentar la energía en el slip, incluso cuando descontamos el efecto del fondo térmico. Cabe destacar que cuando no hay oscilaciones de ningún tipo se produce una excepción, a temperaturas de 41 K y 207 K vemos menor disipación (una vez restado el fondo térmico) que a temperatura cero o a temperaturas más altas. También se puede observar una dependencia interesante de la disipación y la fuerza máxima en las oscilaciones *in-plane* para temperaturas de 207 K y 414 K , ya que ambas crecen con la amplitud de las oscilaciones.

Además las gráficas aquí presentadas permiten apreciar claramente las diferencias entre los dos tipos de oscilaciones. Tanto la actuación *out-of-plane* como la *in-plane* producen una disminución de la fuerza de fricción media. Sin embargo el mecanismo de actuación en ambos casos es muy distinto, mientras que el primero lleva asociado una disminución de la fuerza de fricción máxima y por tanto una disminución de la energía disipada en el slip; el caso de la actuación *in-plane* se muestra diferente: la fuerza de fricción máxima permanece constante y la energía disipada en el slip no cambia. Por tanto el primer ejemplo puede proponerse como esquema para reducir la fricción a nivel atómico, mientras que el segundo no resultaría efectivo; de hecho podría llegar a ser contraproducente, atendiendo a las dependencias de la energía disipada y la fuerza máxima con la amplitud de oscilación β a temperaturas 414 K y 207 K [figura 4.13].

ANEXO A

Puesto que durante la realización del trabajo ha sido necesario calcular una gran cantidad de magnitudes bajo muy diferentes condiciones, en este anexo solo se muestra el programa más sencillo que incluye el núcleo común de todos los programas. El programa es:

```
#include <stdlib.h>
#include <stdio.h>
#include <math.h>
#include <time.h>

#define PI 3.14159264
#define k 10.
#define KT 0.5
#define m 1.

#define gamma 10.
#define U 10.
#define a 1.
#define Vc 0.1

#define omegap (sqrt(k/m))
#define gammatilde /*(gamma/omegap) */ 2.
#define etapt /*(4*PI*PI*U/(k*a*a))*/ 7.
#define Vtilde /*(Vc*2*PI/(omegap*a))*/ 0.0001
#define KTilde /* 4*PI*PI*KT/(k*a*a) */ 0.05

#define alpha 0

#define tf (2.390970*2*PI/Vtilde) //2*PI/Vtilde es un stick-slip
#define dt (2*PI/100000)

#define raizD sqrt(4*gammatilde*KTilde*dt)

////////// Generador Parisi-Rapuno //////////

#define FNORM (2.3283063671E-10F)
#define RANDNEW ( (irr[ip++]=irr[ip1++]+irr[ip2++]) ^ irr[ip3++] )
#define FRANDOM (FNORM*RANDNEW)

unsigned char ip=128,ip1=128-24,ip2=128-55,ip3=128-61;
unsigned int irr[256];

////////////////////////////////////

void generador_gaussiano(double*, double*);
void ini_ran(int SEMILLA);

double force(double,double,double,double);
```

```

////////////////////////////////////
int main()
{
    ini_ran(time(NULL));

    int i, j;
    double dx, x, Xc, v, t, frec, Z1, Z2, g1, g2, k1, k2, fuerza, Fmedia, QTdis, Qdis;
    double tiempo;
    double Cinetico, Potsustrato, Potmuelle, Inputmuelle, Inputtermico;
    t=2.360970*2*PI/Vtilde;
    FILE*f;
    tiempo=time(NULL);
    //-----Condiciones iniciales-----
    Xc=0;
    Fmedia=0;
    QTdis=0;
    x=7.841621;
    v=0.008953;

    frec=0.0035;
    //-----

    f=fopen("datos_KT0.05.dat","w");

    //-----Evolucion-----

    for(i=0;t<tf;i++)
    {
        if(i%2!=0.)
        {
            k1=v*dt;
            g1=dt*force(x, v, t, frec);
            k2=dt*(v+g1+raizD*Z2);
            g2=dt*force(x+k1, k2/dt, t+dt, frec);
            v=v+0.5*(g1+g2)+raizD*Z2;
            x=x+0.5*(k1+k2);
            Xc+=dt*vtilde;
            Cinetico=raizD*Z2*v/dt+(g1+g2)*v/(2*dt);
        }
        else
    }
}

```

```

r1=FRANDOM;
r2=FRANDOM;

*Z1=-sqrt(-log(r1))*cos(2*PI*r2);
*Z2=-sqrt(-log(r1))*sin(2*PI*r2);
}

void ini_ran(int SEMILLA)
{
    int INI,FACTOR,SUM,i;

    srand(SEMILLA);

    INI=SEMILLA;
    FACTOR=67397;
    SUM=7364893;

    for(i=0;i<256;i++)
    {
        INI=(INI*FACTOR+SUM);
        irr[i]=INI;
    }
}

////////////////////////////////////

double force(double x, double v, double t,double frec){
return -etapt*(1+alpha*sin(2*PI*frec*t))*sin(x)+(Vtilde*t-x)-gammatilde*v;
//return -k*x-gamma*v;
}

```

Y el núcleo que comparten todos los programas (que se explicará brevemente):

```

    for(i=0;t<tf;i++)
    {

    if(i%2!=0.)
    {
        k1=v*dt;
        g1=dt*force(x, v, t, frec);
        k2=dt*(v+g1+raizD*Z2);
        g2=dt*force(x+k1, k2/dt, t+dt, frec);
        v=v+0.5*(g1+g2)+raizD*Z2;
        x=x+0.5*(k1+k2);
        Xc+=dt*Vtilde;
        Cinetico=raizD*Z2*v/dt+(g1+g2)*v/(2*dt);
    }
    else
    {
        generador_gaussiano(&Z1,&Z2);
        k1=v*dt;
        g1=dt*force(x, v, t,frec);
        k2=dt*(v+g1+raizD*Z1);
        g2=dt*force(x+k1, k2/dt, t+dt, frec);
        v=v+0.5*(g1+g2)+raizD*Z1;
        x=x+0.5*(k1+k2);
        Xc+=dt*Vtilde;
        Cinetico=raizD*Z1*v/dt+(g1+g2)*v/(2*dt);
    }
}

```

Las variables x , t y v son posición, tiempo y velocidad respectivamente. Los parámetros $k1$, $k2$, $g1$ y $g2$ son los auxiliares necesarios para simular la ecuación de orden 2 con temperatura. Tanto $Z1$ como $Z2$ son números aleatorios con distribución gaussiana obtenidos a partir del algoritmo de Box-Muller. $raizD$ es el parámetro directamente proporcional a la temperatura, utilizado para fijar la anchura de la distribución de $Z1$ y $Z2$, es decir, a mayor temperatura mayor será $raizD$ y por tanto más variarán velocidad y posición. La función *force* calcula la fuerza sobre la punta excluyendo la temperatura de acuerdo a la expresión:

$$\ddot{x} = \eta \cdot \text{sen}(x) - (x - v'\tau) - \gamma'\dot{x}$$

Además *Vtilde* se corresponde con la velocidad adimensional de la punta y *Xc* con la posición del cantilever. Por último el término *Cinético* se corresponde con el valor de la variación de la energía cinética durante un diferencial de tiempo dt .

Bibliografía

- [1] S. Maier O. Pfeiffer A. Baratoff R. Bennewitz E. Meyer A. Socoliuc, E. Gnecco. Atomic-scale control of friction by actuation of nanometer-sized contacts. *Science*, 313, 2006.
- [2] V. Bormuth. Protein friction limits diffusive and directed movements of kinesin motors on microtubules. *Science*, 325:870–873, 2009.
- [3] R.W. Carpick I. Szlufarska, M. Chandross. Recent advances in single-asperity nanotribology. *Journal of Physics D: Applied Physics*, 2008.
- [4] S. Maier. *Contact Dynamics from the Atomic Scale to Nanostructured Surfaces*. PhD thesis, Universität Basel, 2006.
- [5] M.H. Müser. Velocity dependence of kinetic friction in the prandtl-tomlinson model. *Physical Review B*, 84, 2011.
- [6] J.J. Mazo O.Y. Fajardo, E. Gnecco. Out-of-plane and in-plane actuation effects on atomic-scale friction. *Physical Review B*, 89, 2014.
- [7] J.J.Mazo O.Y. Fajardo. Surface defects and temperature on atomic friction. *J. Phys.: Condens. Matter*, 2011.
- [8] A. Baratoff S. Maier T. Glatzel E. Meyer P. Steiner, R. Roth E. Gnecco. Two-dimensional simulation of superlubricity on nacl and highly oriented pyrolytic graphite. *Physical Review B*, 79, 2009.
- [9] L. Prandtl. Ein gedankenmodell zur kinetischen theorie der festen koerper. *Zeitschrift fuer Angewandte Mathematik und Mechanik*, 8:85–106, 1928.
- [10] C. H. Scholtz. Earthquakes and friction laws. *Science*, 391:37–42, 1998.
- [11] I. Sung R.W. Carpick S.N. Medyanik, W.K. Liu. Predictions and observations of multiple slip modes in atomic-scale friction. *Physical Review Letters*, 97, 2006.
- [12] G. A. Tomlinson. A molecular theory of friction. *Philosophical Magazine*, 7:905–939, 1929.
- [13] Ashlie Martini Y. Dong, A.Vadakkappatt. Analytical models for atomic friction. *Tribology Letters*, 2011.
- [14] M.Grant Y. Sang, M.Dubé. Thermal effects on atomic friction. *Physical Review L*, 87(17), 2001.